Zur rationellen Bestimmung der irreduziblen Bestandteile einer vorgegebenen Tensordarstellung in den 32 Kristallklassen

Müller, Klaus

Veröffentlicht in:
Abhandlungen der Braunschweigischen Wissenschaftlichen Gesellschaft Band 9, 1957, S.123-134

Friedr. Vieweg & Sohn, Braunschweig

Zur rationellen Bestimmung der irreduziblen Bestandteile einer vorgegebenen Tensordarstellung in den 32 Kristallklassen

Von **Klaus Müller**, Braunschweig

Vorgelegt von Herrn **M. Kohler**

Summary: In terms of a group-theoretical notation of crystal symmetry a simple scheme is derived and discussed which allows to classify any given tensor with regard to irreducible representations of the crystallographic groups.

To construct a complete decomposition-table for all 32 classes, a system of relating equations with universal constants has to be applied to a set of five numbers which sufficiently represent the specific properties (viz. order, intrinsic symmetry) of the tensor, and on which all results are dependent. Algebraic calculations with the representations are eliminated.

The five characteristic values N_z, namely the number of independent components under the influence of a z-fold axis ($z = 1; 2; 3; 4; 6$), can be calculated by means of elementary methods or special formulas given in the paper,

Examples of third, fourth, sixth, & eighth order matter tensors illustrate the use of the scheme.

1. Ziel der Arbeit

Bei kristallographischen Untersuchungen sind häufig Tensoren an Kristallsymmetrien anzupassen. In manchen Fällen, z. B. zur Kontrolle der Rechnungen, interessiert nicht der Bau der angepaßten Komponenten, sondern nur die Anzahl der unabhängigen unter ihnen. Um sie zu ermitteln, hat man abzuzählen, wieviel „Einsdarstellungen" in der reduziblen Tensordarstellung der betreffenden Kristallklasse enthalten sind (*Bhagavantam* und Mitarbeiter, 1942, 1949, 1951). Die gleiche Aufgabe, Tensordarstellungen auszureduzieren, tritt in der Physik häufig auf, z. B. in der Spektroskopie von Mehrelektronensystemen: die aus Einelektronenfunktionen gebildeten Produkteigenfunktionen haben Tensorcharakter (vgl. Fußnoten bei *Racah*, 1933, und *Gamba*, 1953). Ausreduktion der Darstellung bei Drehsymmetrie R_∞ liefert die möglichen Kombinationen der Einzeldrehimpulse zum Gesamtdrehimpuls für kugelsymmetrisches Potential. Unter dem Einfluß eines kristallsymmetrischen Feldes müssen die Kugeldarstellungen weiter ausreduziert werden. Ihre irreduziblen Bestandteile beschreiben die Termaufspaltung in den einzelnen Kristallklassen, die durch Aufhebung der Drehimpulsentartung entsteht.

Einige Ergebnisse der Aufspaltung in den Kristallklassen sind in der Literatur tabelliert, so für eine Reihe häufig vorkommender Tensoren bei *Jahn* (1938; 1949). Seine Methode der schrittweisen Tensorkomposition und -Reduktion unter Ausnutzung von *Tiszas* Produktbeziehungen irreduzibler Darstellungen ist sehr durchsichtig, wird allerdings für höhere Tensorstufen etwas mühsam. *Bhagavantam* u. *Suryanarayana* (1949) benutzen Gruppen-charaktere (*Wigner*, 1931), ermitteln jedoch zur Lösung des eingangs beschriebenen Problems nur die Einsdarstellungen. Auf diese beschränkt sich auch *Gambas* Formel.

In der vorliegenden Arbeit werden Beziehungen bereitgestellt, mit welchen für einen Tensor vorgegebener Eigensymmetrie rasch eine kristallographische Zerfalls-Tafel angeschrieben werden kann, welche angibt, wie oft die irreduziblen Darstellungen sämtlicher 32 Kristallklassen in der (reduziblen) Tensordarstellung enthalten sind. Eigensymmetrie braucht nur einmal am Anfang des Rechenganges berücksichtigt zu werden, das anschließende Rechenschema ist unabhängig von den spezifischen Tensoreigenschaften (Stufe, Symmetrie). Algebraische Kalkulationen mit den Darstellungen selbst werden vermieden. Infolge der naturgemäßen Ganzzahligkeit der i. a. durch Division gewonnenen (Zwischen-) Ergebnisse eliminieren sich Rechenfehler praktisch von selbst.

In 2. wird zunächst eine in der Literatur wenig bekannte Symbolik (*Meyer*, 1953) eingeführt, in der sich die gruppentheoretische Struktur der Kristallklassen besonders einfach ausdrückt. Dies führt in 3. zu einer rationellen Formulierung der zahlreichen Relationen in der Zerfallstafel und damit zu einem sukzessive anwendbaren Rechenschema, welches die für jeden Tensor neu zu lösende Aufgabe auf die Bestimmung von fünf Zahlen reduziert, die sich mit den Methoden von 4. leicht ermitteln lassen. Beispiele hierfür bringt 5.

2. Symbolik

Kristallklassen sind:

a) reine Drehgruppen:

C_z, zyklische Gruppen (z-zählige Achse), z Elemente;
D_z, Diedergruppen (z zweizählige Achsen senkr. zu C_z), $2\,z$ Elemente;
O, Oktaedergruppe (24 Elem.); T, Tetraedergruppe (12 Elem.);

b) Drehgruppen mit Inversion j:

$G_j = G + j \times G$, wo G eine Gruppe aus a), Elementzahl verdoppelt sich;

c) Drehinversions-Gruppen, welche die Inversion selbst *nicht* enthalten:

$H|G = H + j \times (G - H)$, G ist Drehgruppe aus a), H Normalteiler vom Index 2 in G; d. h. nur Elemente, die nicht in H liegen, sind mit der Inversion multipliziert, die Elementzahl ist gleich der von G.

Die Bezeichnungsweise ist, $D_1 = C_2$ ausgenommen, eindeutig und liefert für $z = 1; 2; 3\ldots$ und bei Hinzunahme der Ikosaedergruppe I alle endlichen Punktgruppen sowie im Grenzübergang $z \to \infty$ die drei unendlichen Untergruppen der vollen Kugelsymmetrie R_∞ bzw. $R_{\infty j}$. Bei Beschränkung auf die Werte $1; 2; 3; 4; 6 = z$ erhält man sofort die $11 + 11 + 10 = 32$ Kristallklassen. Tabelle 1 gibt die korrespondierenden Symbole von *Schoenfließ* und *Mauguin*.

Γ bezeichne die irreduziblen Darstellungen der reinen Drehgruppen 2. a). $H|G$ hat die gleichen Darstellungen wie G (*Bethe*). In G_j werden die Γ fort-

Tabelle 1

Nr.	*Meyer*	*Schoenfließ*	*Mauguin*
Triklin:			
1	C_1	C_1	1
2	C_{1j}	C_1^i	$\bar{1}$
Monoklin:			
3	C_2	C_2	2
4	C_{2j}	C_2^h	$2/m$
5	$C_1 \vert C_2$	C_s	m
Rhombisch:			
6	D_2	$D_2 = V$	222
7	D_{2j}	D_2^h	mmm
8	$C_2 \vert D_2$	C_2^v	$mm\,2$
Trigonal:			
9	C_3	C_3	3
10	C_{3j}	C_3^i	$\bar{3}$
11	D_3	D_3	32
12	D_{3j}	D_3^d	$\bar{3}\,m$
13	$C_3 \vert D_3$	C_3^v	$3\,m$
Tetragonal:			
14	C_4	C_4	4
15	C_{4j}	C_4^h	$4/m$
16	$C_2 \vert C_4$	S_4	$\bar{4}$
17	D_4	D_4	422
18	D_{4j}	D_4^h	$4/mmm$
19	$C_4 \vert D_4$	C_4^v	$4\,mm$
20	$D_2 \vert D_4$	D_2^d	$\bar{4}2\,m$
Hexagonal:			
21	C_6	C_6	6
22	C_{6j}	C_6^h	$6/m$
23	$C_3 \vert C_6$	C_3^h	$\bar{6}$
24	D_6	D_6	622
25	D_{6j}	D_6^h	$6/mmm$
26	$C_6 \vert D_6$	C_6^v	$6\,mm$
27	$D_3 \vert D_6$	D_3^h	$\bar{6}2\,m$
Kubisch:			
28	T	T	23
29	T_j	T^h	$m\,3$
30	O	O	43
31	O_j	O^h	$m\,3\,m$
32	$T \vert O$	T^d	$\bar{4}3\,m$
Kontinuierliche Gruppen:			
	C_∞	C_∞	
	$C_{\infty j}$	C_∞^h	
	D_∞	D_∞	
	$D_{\infty j}$	D_∞^h	
	$C_\infty \vert D_\infty$	C_∞^v	
	R_∞	R_∞	
	$R_{\infty j}$	R_∞^i	

gesetzt in „positive" Γ^+ und „negative" Γ^- (je nach dem Vorzeichen der Inversionsmatrix). Polare Tensoren gerader und axiale Tensoren ungerader Stufe transformieren sich nach Γ^+, die übrigen nach Γ^-. $\overline{\Gamma}$ bezeichne diejenige Darstellung, welche durch Multiplikation der in $G - H$ liegenden Matrizen mit -1 entsteht. $\overline{\Gamma}$ gehört zu $H|G$, ist aber zugleich irreduzible Darstellung von G. Γ' sei die Darstellung von H, welche aus Γ von G nach Streichen der in $G - H$ liegenden Matrizen resultiert. Im einzelnen benutzen wir die Darstellungs-Symbolik von *Tisza* (1933), A_1 bedeute stets die Einsdarstellung der Gruppe.

Für die Vielfachheiten der Zerfallstafel schreiben wir $N_\Gamma^\pm\,(K, s)$, wo das Vorzeichen die positive von der negativen (reduziblen!) Tensordarstellung unterscheidet. (K irgendeine Kristallklasse, s die häufig unterdrückte Tensorstufe.) N hängt natürlich noch von der Eigensymmetrie ab, die wir nicht besonders kennzeichnen.

Tabelle 2

Vorbemerkungen: Γ^* ist im Komplexen weiter reduzierbar in ein konjugiert komplexes Paar mit korrespondierenden wesentlich komplexen irreduziblen Tensoren. Bei Unterscheidung dieser Größen ist N_Γ daher noch mit der in Klammern angegebenen Multiplizität zu versehen.

Γ_{12} kennzeichnet die Entartung $\Gamma_1 = \Gamma_2$ in einer *Unter*gruppe: $N_{\Gamma_{12}} = N_{\Gamma_1} + N_{\Gamma_2}$.

Klasse	Darst.	Drehgruppen C_z und D_z			
		E_0	E_1	E_2	E_3
C_1	Γ	A_{12}	—	—	—
	N_Γ	N_1	—	—	—
C_2	Γ	A_{12}	B_{12}	—	—
	N_Γ	N_2	$N_1 - N_2$	—	—
C_3	Γ	A_{12}	E_1^* (2)	—	—
	N_Γ	N_3	$\frac{N_1 - N_3}{2}$	—	—
C_4	Γ	A_{12}	E_1^* (2)	B_{12}	—
	N_Γ	N_4	$\frac{N_1 - N_2}{2}$	$N_2 - N_4$	—
C_6	Γ	A_{12}	E_1^* (2)	E_2^* (2)	B_{12}
	N_Γ	N_6	$\frac{N_1 - N_2 - N_3 + N_6}{2}$	$\frac{N_2 - N_6}{2}$	$N_3 - N_6$
D_2	Γ	A_1	B_1	—	—
	N_Γ	$\frac{3N_2 - N_1}{2}$	$\frac{N_1 - N_2}{2}$	—	—
	Γ	A_2	B_2	—	—
	N_Γ	$\frac{N_1 - N_2}{2}$	$\frac{N_1 - N_2}{2}$	—	—
D_3	Γ	A_1	E_1	—	—
	N_Γ	$\frac{N_3 + 2N_2 - N_1}{2}$	$\frac{N_1 - N_3}{2}$	—	—
	Γ	A_2	—	—	—
	N_Γ	$\frac{N_3 - 2N_2 + N_1}{2}$	—	—	—
D_4	Γ	A_1	E_1	B_1	—
	N_Γ	$\frac{N_4 + 2N_2 - N_1}{2}$	$\frac{N_1 - N_2}{2}$	$\frac{N_2 - N_4}{2}$	—
	Γ	A_2	—	B_2	—
	N_Γ	$\frac{N_4 - 2N_2 + N_1}{2}$	—	$\frac{N_2 - N_4}{2}$	—
D_6	Γ	A_1	E_1	E_2	B_1
	N_Γ	$\frac{N_6 + 2N_2 - N_1}{2}$	$\frac{N_1 - N_2 - N_3 + N_6}{2}$	$\frac{N_2 - N_6}{2}$	$\frac{N_3 - N_6}{2}$
	Γ	A_2	—	—	B_2
	N_Γ	$\frac{N_6 - 2N_2 + N_1}{2}$	—	—	$\frac{N_3 - N_6}{2}$

Klasse	Darst.	Drehgruppen O und T		
		A	E	F
T	Γ	A_{12}	E^* (2)	F_{12}
	N_Γ	$\frac{2N_3+N_2-N_1}{2}$	$\frac{N_2-N_3}{2}$	$\frac{N_1-N_2}{2}$
O	Γ	A_1	E	F_1
	N_Γ	$\frac{N_4+N_3+N_2-N_1}{2}$	$\frac{N_2-N_3}{2}$	$\frac{N_1-2N_2+N_4}{2}$
	Γ	A_2	—	F_2
	N_Γ	$\frac{N_3-N_4}{2}$	—	$\frac{N_2-N_4}{2}$

3. Relationen in der Zerfallstafel

a) für Klassen vom Typ 2. a):

Aus der bekannten Abzählformel (*Wigner*)

$$N_\Gamma(K)=\frac{1}{h(K)}\sum_g \chi'(g)\,\chi_{K,\Gamma}(g) \tag{1}$$

(h = Elementzahl von K, g durchläuft alle Elemente) und der Bemerkung, daß die $\chi'(g)$ der Tensordarstellung reelle Funktionen vom Cosinus des Drehwinkels sind, folgt, daß vom vorgegebenen Tensor nur die fünf Charaktere χ'_φ mit kristallographischen Argumenten $2\pi, \pi, \frac{2\pi}{3}, \frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{3}$ in die Kalkulation eingehen. Demgemäß sind alle $N_\Gamma(K)$ durch fünf von ihnen schon festgelegt und lassen sich aus linearen Beziehungen mit universellen Konstanten $\chi_{K,\Gamma}(\varphi)$ bestimmen. Als Basis wählen wir die Vielfachheiten der Einsdarstellungen ($\chi_{K,\Gamma}(\varphi)\equiv 1$) für die fünf Symmetrieachsen C_1; C_2; C_3; C_4; C_6:

$$N_z\equiv N_{A\,1}(C_z)=\frac{1}{z}\sum_{\varrho=1}^{z}\chi'\left(\varrho\cdot\frac{2\pi}{z}\right),\quad z=1;2;3;4;6. \tag{2}$$

Elimination der χ' aus Gl. (1) und (2) liefert die Relationen (Tab. 2).

Für die mit j komponierten Klassen gilt nun sukzessive:

b) Typ 2. b):

$$\left.\begin{aligned} N^+_{\Gamma^+}(G_j)&=N^-_{\Gamma^-}(G_j)=N_\Gamma(G)\,;\\ N^-_{\Gamma^+}(G_j)&=N^+_{\Gamma^-}(G_j)=0\,.\end{aligned}\right\} \tag{3}$$

Tabelle 3

s. auch Vorbemerk. z. Tab. 2

$\overline{\Gamma}$	Γ
C_2	$C_1 \mid C_2$
A_{12}	B_{12}
B_{12}	A_{12}

$\overline{\Gamma}$	Γ
D_2	$C_2 \mid D_2$
A_1	A_2
A_2	A_1
B_1	B_2
B_2	B_1

$\overline{\Gamma}$	Γ
D_3	$C_3 \mid D_3$
A_1	A_2
A_2	A_1
E_1	E_1

$\overline{\Gamma}$	Γ
C_4	$C_2 \mid C_4$
A_{12}	B_{12}
B_{12}	A_{12}
$E_1{}^*$	$E_1{}^*$

$\overline{\Gamma}$	Γ	
D_4	$C_4 \mid D_4$	$D_2 \mid D_4$
A_1	A_2	B_1
A_2	A_1	B_2
B_1	B_2	A_1
B_2	B_1	A_2
E_1	E_1	E_1

$\overline{\Gamma}$	Γ
C_6	$C_3 \mid C_6$
A_{12}	B_{12}
B_{12}	A_{12}
$E_1{}^*$	$E_2{}^*$
$E_2{}^*$	$E_1{}^*$

$\overline{\Gamma}$	Γ	
D_6	$C_6 \mid D_6$	$D_3 \mid D_6$
A_1	A_2	B_1
A_2	A_1	B_2
B_1	B_2	A_1
B_2	B_1	A_2
E_1	E_1	E_2
E_2	E_2	E_1

$\overline{\Gamma}$	Γ
0	$T \mid 0$
A_1	A_2
A_2	A_1
E	E
F_1	F_2
F_2	F_1

c) Typ 2. c):

$$\left.\begin{aligned} &N_{\Gamma}^{+}(H\,|\,G) = N_{\Gamma}(G)\,;\\ &N_{\Gamma}^{-}(H\,|\,G) = N_{\overline{\Gamma}}(G) \text{ oder } N_{\Gamma}^{-}(H\,|G) = N_{\Gamma'}(H) - N_{\Gamma}(G)\,. \end{aligned}\right\} \tag{4}$$

($\overline{\Gamma}$ siehe Tab. 3)

Gl. (3) und (4) sind auch gültig für Punktgruppen nach 2., die nicht Kristallklassen sind. Die Relationen a) bis c) gelten für beliebige Darstellungen, die in der vollen Drehspiegelungsgruppe $R_{\infty j}$ definiert sind. Danach also insbesondere für die gewöhnlichen (d. h. aus Vektoren der Kugeldarstellung D_1 komponierten) Tensoren $t_{ik\ldots}$ (i, k = 1; 2; 3) (entsprechend Produkteigenfunktionen der p-Elektronenzustände). Weiter aber auch für Kompositionsgrößen von $2\,l + 1$-komponentigen „Vektoren" der Darstellungen D_l, wie sie als Produkte von $s, p, d, f\ldots$ Zuständen bei Mehrelektronensystemen auftreten. Die Indizes i, k... laufen hier von 1 bis $2\,l + 1$. —

Damit ist die gesamte Zerfallstafel auf die fünf charakteristischen Zahlen N_z ($z = 1; 2; 3; 4; 6$) zurückgeführt.

4. Zur Bestimmung der N_1, N_2, N_3, N_4, N_6

Ihre physikalische Bedeutung ist folgende (vgl. 1.): N_z gibt an, wieviel Koeffizienten der Tensor bei Anpassung an eine z-zählige Symmetrieachse besitzt. Danach kann man entweder Literaturergebnisse von 1. benutzen oder folgende Methoden bzw. Formeln anwenden.

A. Für nicht zu große s und beliebige Eigensymmetrie findet man N_z einfach, indem man abzählt, wie viele der (in den Indizes unabhängigen!) $T_{i_1 i_2 \ldots i_s}$ ($i = 1; 2; 3$) *Wondratscheks* Auswahlregel $\alpha - \beta \equiv 0 \pmod{z}$ gehorchen. (Darin geben die $\alpha; \beta; s - (\alpha + \beta)$ an, wie oft die Indizes 1; 2; 3 in $i_1 i_2 \ldots i_s$ vorkommen. Man beachte, daß die T nicht kartesisch sind, sondern *Roses* „sphärische" Linearkombinationen der gewöhnlichen $t_{ik\ldots}$ darstellen.) S. auch Beispiele.

B. Für viele Eigensymmetriestrukturen und beliebiges s kann man N_z direkt aus der recht allgemeinen Formel von *Gamba* entnehmen.

C. Wir geben noch einige geschlossene Ausdrücke an. Für den total unsymmetrischen Tensor s-ter Stufe (d. h. keine Indizes vertauschbar) ist $\chi'_{\varphi} = \chi\, V^s$ von Nr. a) in Tab. 4 und nach Gl. (2):

$$N_z(s) = \frac{1}{z} \sum_{\varrho=1}^{z} \left(1 + 2\cos \varrho \cdot \frac{2\pi}{z}\right)^s, \tag{5}$$

(für $s = 0$ ist $0^0 = 1$ zu setzen!). Dieser Ausdruck faßt zahlreiche Formeln *Wondratscheks* zusammen. Übrigens sind die $N_z(s)$ bei Abwesenheit von Eigensymmetrie stets ungerade (Gl. (13)!).

Tabelle 4

s. auch *Niggli*, Tab. 3.
*) s. Fußnote S. 123

$V = D_1 =$ dreidimensionale Vektordarstellung.

Nr.	Totale Eigen-sym.	Darst. nach *Jahn*	χ'	$\varphi = 2\pi$	π	$\frac{2}{3}\pi$	$\frac{\pi}{2}$	$\frac{\pi}{3}$
1	i	B	χ_φ	b_1	b_2	b_3	b_4	b_6
2	$i\,k$	$[B^2]$	$[\chi_\varphi^2]$	$\binom{b_1+1}{2}$	$\binom{b_2+1}{2}+\frac{1}{2}(b_1-b_2)$	$\binom{b_3+1}{2}$	$\binom{b_4+1}{2}+\frac{1}{2}(b_2-b_4)$	$\binom{b_6+1}{2}+\frac{1}{2}(b_3-b_6)$
3	$i\,k\,l$	$[B^3]$	$[\chi_\varphi^3]$	$\binom{b_1+2}{3}$	$\binom{b_2+2}{3}+\frac{1}{2}b_2(b_1-b_2)$	$\binom{b_3+2}{3}+\frac{1}{3}(b_1-b_3)$	$\binom{b_4+2}{3}+\frac{1}{2}b_4\cdot$ $\cdot(b_2-b_4)$	$\binom{b_6+2}{3}+\frac{1}{2}b_6\cdot$ $\cdot(b_3-b_6)+\frac{1}{3}(b_2-b_6)$
4	$i\,k\,l\,m$	$[B^4]$	$[\chi_\varphi^4]$	$\binom{b_1+3}{4}$	$\binom{b_2+3}{4}+\frac{1}{8}(b_1-b_2)\cdot$ $\cdot\{2+b_1+b_2(2b_2+1)\}$	$\binom{b_3+3}{4}+\frac{1}{3}b_3(b_1-b_3)$	$\binom{b_4+3}{4}$ $+\frac{1}{8}(b_2-b_4)\{b_2+$ $+b_4(2b_4+1)\}+$ $+\frac{1}{4}(b_1-b_4)$	$\binom{b_6+3}{4}$ $+\frac{1}{3}b_6(b_2-b_6)+$ $+\frac{1}{8}(b_3-b_6)\{2+$ $+b_3+b_6(2b_6+1)\}$
a)	$i =$ total unsymmetr. Tensor q-ter Stufe, $B = V^q,\ \chi_\varphi = \chi\,V^q = (1+2\cos\varphi)^q$			3^q	$(-1)^q$	$\begin{cases} 0 & (q \geq 1) \\ 1 & (q = 0) \end{cases}$	1	2^q
b)	$i =$ total symmetr. Tensor q-ter Stufe, $B = [V^q],\ \chi_\varphi = \chi\,[V^q] = \dfrac{\sin\frac{q+1}{2}\varphi\,\sin\frac{q+2}{2}\varphi}{\sin\frac{\varphi}{2}\sin\varphi}$			$\binom{q+2}{2}$	$(-1)^q\left[\frac{q+2}{2}\right]$*)	$\begin{cases} 0 & (q \equiv 1;\ 2) \\ 1 & (q \equiv 0) \end{cases}$ (mod 3)	$\begin{cases} 0 & (q \equiv 2;\ 3) \\ 1 & (q \equiv 0;\ 1) \end{cases}$ (mod 4)	$\begin{cases} 0 & (q \equiv 4;\ 5) \\ 1 & (q \equiv 0;\ 3) \\ 2 & (q \equiv 1;\ 2) \end{cases}$ (mod 6)

Im anderen Grenzfall totaler Symmetrie wird $\chi'_\varphi = \chi\,[V^s]$ und

$$N_1 = \binom{s+2}{2};$$

$$N_2 = \left[\frac{s+2}{2}\right]^2;\text{[1]}$$

$$N_3 = \begin{cases} 1 + \frac{1}{6}\, s\,(s+3); & (s \equiv 0) \\ \frac{1}{6}\,(s+1)\,(s+2); & (s \equiv 1;\, 2) \end{cases} \pmod 3$$

$$N_4 = \begin{cases} 1 + \frac{1}{2}\left[\frac{s}{2}\right]\left[\frac{s+4}{2}\right]; & (s \equiv 0;\, 1) \\ \frac{1}{2}\left[\frac{s+2}{2}\right]^2; & (s \equiv 2;\, 3) \end{cases} \pmod 4 \tag{6}$$

$$N_6 = \begin{cases} 1 + \frac{1}{3}\left[\frac{s}{2}\right]\left[\frac{s+4}{2}\right]; & (s \equiv 0;\, 1;\, 2;\, 3) \\ \frac{1}{3}\left[\frac{s+2}{2}\right]^2; & (s \equiv 4;\, 5) \end{cases} \pmod 6$$

Mit Gl. (6) identisch, aber mühsamer auszuwerten, ist der Summenausdruck

$$N_z\,(s) = 1 + \left[\frac{s}{2}\right] + 2 \sum_{l=0}^{\left[\frac{s}{2}\right]} \left[\frac{s-2\,l}{z}\right] \quad (z \text{ beliebig}), \tag{7}$$

den man bei schrittweiser Ausreduktion über die Kugeldarstellungen D_l erhält. Hier gilt $N_z\,(s) = N_z\,(s+1)$ für *gerade* Werte z und s.

Ebenso ergibt sich für einen Tensor $t_{mn} \simeq t_{i_1\, i_2 \ldots i_q,\, k_1\, k_2 \ldots k_q}$ der Stufe $s = 2\,q$, bei dem die i_ϱ untereinander als auch die k_ϱ untereinander beliebig vertauschbar sind $(i, k = 1;\, 2;\, 3)$:

$$N_z\,(2\,q) = \sum_{l=0}^{2q} a\,(q,l)\left(1 + 2\cdot\left[\frac{l}{z}\right]\right) \tag{8}$$

mit

$$a\,(q,l) = \frac{1}{2}\left[\frac{2\,q-l+2}{2}\right]\cdot\left[\frac{2\,q-l+4}{2}\right] - 2\cdot\left[\frac{q-l+1}{2}\right]\cdot\left[\frac{q-l+2}{2}\right]. \tag{9}$$

Kommt noch die Symmetrie $mn = nm \left(m, n = 1;\, 2;\ldots;\, \binom{q+2}{2}\right)$ hinzu, ist a in Gl. (8) zu ersetzen durch

$$\bar{a} = \frac{1}{2}\left\{a + (-1)^l \left[\frac{\left[\frac{2\,q-l+4}{2}\right]}{2}\right]\right\}. \tag{10}$$

[1]) Auf Zahlen angewandt, bedeute die eckige Klammer: $[a] = z_a$, wenn $a \geq 0$; $[a] = 0$, wenn $a \leq 0$; hierbei ist z_a die größte ganze Zahl $\leq a$.

D. Schließlich bieten sich beim Übergang zu komplizierteren Eigensymmetriestrukturen die Charakterenregeln der Tensorkomposition an. Wir unterscheiden

D_1. direktes oder Kroneckerprodukt (*Wigner*); t_{mn} komponiert aus $t_m^{(1)}$ und $t_n^{(2)}$, $mn \neq nm$:

$$\chi_\varphi^{(\mathrm{res})} = \chi_\varphi^{(1)} \cdot \chi_\varphi^{(2)}; \tag{11}$$

D_2. symmetrisiertes Produkt (*Tisza*; *Jahn*); t_{mn} komponiert aus t_m mit sich selbst, wobei $mn\ldots$ totalsymmetrisch:

$$\begin{aligned} &\text{zweifach: } [\chi_\varphi^2] = \frac{1}{2}\left(\chi_\varphi^2 + \chi_{2\varphi}\right); \\ &\text{dreifach: } [\chi_\varphi^3] = \frac{1}{6}\left(\chi_\varphi^3 + 3\,\chi_\varphi \chi_{2\varphi} + 2\,\chi_{3\varphi}\right); \\ &\text{vierfach: } [\chi_\varphi^4] = \frac{1}{24}\left(\chi_\varphi^4 + 6\,\chi_\varphi^2 \chi_{2\varphi} + 8\,\chi_\varphi \chi_{3\varphi} + 3\,\chi_{2\varphi}^2 + 6\,\chi_{4\varphi}\right); \end{aligned} \tag{12}$$

Speziell für kristallographische Argumente sind diese Ausdrücke in Tab. 4 bereitgestellt. Mit Hilfe der Korrespondenzen Gl. (2) lassen sich im konkreten Fall die resultierenden N_z ($z = 1; 2; 3; 4; 6$) des Produkttensors aus den entsprechenden Zahlen der „Faktoren“ sofort ermitteln. S. Beispiele.

5. Beispiele

Zuerst sei die Anzahl der unabhängigen Koeffizienten, d. h. N_{A_1}, des piezoelektrischen Tensors $t_{ik,l} = t_{ki,l}$ in den Kristallklassen bestimmt. Da bei Inversion das Vorzeichen wechselt, ist t „negativ“. *Wondratschek*s Auswahlregel 4. A. ergibt:

$z = 1$; α, β beliebig; $N_1 = 6 \cdot 3 = 18$

$z = 2$; $\alpha \equiv \beta \pmod 2$; $\alpha = 0: 333; 223; 232 = 322;$
$\alpha = 1: 123 = 213; 132 = 312; 231 = 321;$
$\alpha = 2: 113; 131 = 311.$ $N_2 = 8$

$z = 3$; $\alpha \equiv \beta \pmod 3$; $\alpha = 0: 333; 222;$
$\alpha = 1: 123 = 213; 132 = 312; 231 = 321;$
$\alpha = 3: 111.$ $N_3 = 6$

$z > 3$; $\alpha = \beta$ wegen $\alpha, \beta \leq 3$; $\alpha = 0: 333;$
$\alpha = 1: 123 = 213; 132 = 312; 231 = 321.$
$N_z = 4$ für alle $z > 3 = s$ (Regel von *Hermann*!).

Für die restlichen Klassen, deren Symmetrieoperationen reine Drehungen sind, hat man jetzt die erste Spalte von Tab. 2 anzuwenden. Hierbei gilt übrigens für beliebiges z

$$N_{A_1}(D_z) = \frac{1}{2}\left(N_z + 2\,N_2 - N_1\right) = \frac{1}{2}\left(N_z + \chi_\pi'\right), \tag{13}$$

d. h. im Beispiel $N_{A1}(D_z) = \frac{1}{2}(N_z - 2)$. Weiter ist $N^-_{A1}(G_j) = 0$, in den 11 Klassen mit Inversion existiert kein piezoelektrischer Effekt. Endlich nimmt Gl. (4) die einfache Form

$$N^-_{A1}(H|G) = N_{A1}(H) - N_{A1}(G) \tag{14}$$

an, woraus noch die allgemeine Beziehung folgt:

$$N^-_{A1}(D_z|D_{2z}) = \frac{1}{2} N^-_{A1}(C_z|C_{2z}). \tag{15}$$

Beim Übergang zwischen den Symmetriegruppen $C_s - m \to C_2^v - mm\,2$; $S_4 - \bar{4} \to D_2^d - \bar{4}2\,m$; $C_3^h - \bar{6} \to D_3^h - \bar{6}2\,m$ wird demgemäß die Koeffizientenzahl irgendeines (angepaßten) Tensors genau halbiert. —

Sei jetzt eine weniger triviale Darstellung gesucht, etwa F_1 von $T^d \simeq T|O$. Die nach Tab. 3 korrespondierende Darstellung ist $\bar{\Gamma} = F_2$, Gl. (4) ergibt $N^-_{F1}(T|O) = N_{F2}(O) = \frac{1}{2}(N_2 - N_4) = 2$.

Wir wollen Gl. (13) noch für den Elastizitätstensor auswerten. Seine Darstellung ist $[[V^2]^2]$, man erhält nach Tab. 4, Nr. 2 mit B aus Nr. b), wenn dort $q = 2$ gesetzt wird, $\chi'_\pi = 5$, demgemäß $N_{A1}(D_z) = \frac{1}{2}(N_{A1}(C_z) + 5)$, eine Formel, die man leicht in *Jahns* Tabelle (1938, S. 196) verifiziert. —

Als nächstes suchen wir die charakteristischen N_z des Tensors 6-ter Stufe der photoelastischen Koeffizienten $t_{pq,u} = t_{qp,u}$ $(p, q, u = 1; 2; \ldots 6)$ mit der Darstellung $[[V^2]^2]\,[V^2]$. Für den „Faktor" $t_p \simeq t_{ik}$ $(i, k = 1; 2; 3)$ ergibt die Auswahlregel: $N^-_{1,2,3,4,6} = 6; 4; 2; 2; 2$, die korrespondierenden Charaktere eliminieren sich aus Gl. (2) zu

$$\begin{aligned} &\chi'_1 = N_1 = 6; && \chi'_4 = 2\,N_4 - N_2 = 0; \\ &\chi'_2 = 2\,N_2 - N_1 = 2; && \\ &\chi'_3 = \frac{1}{2}(3\,N_3 - N_1) = 0; && \chi'_6 = \frac{1}{2}(6\,N_6 - 2\,N_2 - 3\,N_3 + N_1) = 2 \end{aligned} \tag{16}$$

und gehören zu $[V^2]$ (weshalb sie hier auch unmittelbar aus Tab. 4, Nr. b) für $q = 2$ entnommen werden könnten); wir identifizieren sie mit den b_z und steigen mit Nr. 2, Tab. 4 auf zu $[[V^2]^2]$: $\chi' = 21; 5; 0; 1; 2$; (auf diese Zahlen könnte man auch aus N_z (4) von Gl. (10) rückschließen; Elastizitätstensor!). Multiplikation der beiden Charakterenreihen liefert $\chi'_{\mathrm{res}} = 126; 10; 0; 0; 4$ und über Gl. (16) zurück sofort $N_{1,2,3,4,6} = 126; 68; 42; 34; 24$. Der Tensor ist „positiv", die Darstellung A_2 ist also z. B. in $T^d \simeq T|O$ ebensooft enthalten wie in O, nämlich (Tab. 2) viermal. —

Entsprechend findet man für die Tensoren achter Stufe

		N_1	N_2	N_3	N_4	N_6
$t_{pqu,v}$	(p, q, u totalsymm. $1, \ldots, 6$), Darstellung $[[V^2]^3]\,[V^2]$	336	176	112	88	60
t_{pquv}	(p, q, u, v totalsymm. $1, \ldots, 6$), Darstellung $[[V^2]^4]$	126	70	42	36	24
t_{mn}	($mn = nm$; $t_m, t_n \simeq t_{pq} = t_{qp}$), Darstellung $[[[V^2]^2]^2]$	231	127	77	65	43

Zur Kontrolle ist die Regel nützlich: beliebige Tensorcharaktere kristallographischer Argumente sind ganzzahlig. —

Literatur

Bethe, H. A., Ann. d. Phys. (5), **3** (1929), S. 139.
Bhagavantam, S., Proc. Indian Acad. Sci. A, **16** (1942), S. 359.
Bhagavantam, S. & Suryanarayana, D., Acta Cryst. **2** (1949), S. 21.
Bhagavantam, S. & Venkatarayudu, T., Theory of Groups and its Application to Physical Problems, Andhra University, 2nd ed., 1951.
Gamba, A., Il Nuovo Cimento **10** (1933), S. 1343—1344.
Handbuch der Physik, Bd. VII, Teil 1, S. 54—59, Berlin, Springer 1955.
Hermann, C., Z. f. Krist. **89** (1934), S. 33—48.
Jahn, H. A., Z. f. Krist. **98** (1938), S. 191—200; Acta Cryst. **2** (1949), S. 30.
Meyer, B., Canadian Journ. of Math. **6** (1953), S. 135—157.
Racah, G., Lincei Rend. (6), **17** (1933), S. 386—389.
Rose, M. E., Proc. Phys. Soc. A, **67** (1954), S. 239—247.
Tisza, L., Z. f. Phys. **82** (1933), S. 54—57.
Wigner, E., Gruppentheorie, Braunschweig, Vieweg 1931.
Wondratschek, H., Neues Jb. f. Mineral., Heft 8/9 (1952), S. 217—234.